二维 $SiSnF_2$ 中非磁性缺陷的影响和量子尺寸效应^{*}

刘文超 罗朝波 谢紫彤 彭向阳†

(湘潭大学物理与光电工程学院,微纳能源材料与器件湖南省重点实验室,湘潭 411105)

(2024年10月27日收到; 2025年1月9日收到修改稿)

一般认为拓扑绝缘体对非磁性缺陷是高度免疫的,但是在器件应用的介观尺度上还缺乏验证.本文以SiSnF2 单层条带为例,研究了不同缺陷浓度和尺寸对拓扑绝缘体电子输运的影响.第一性原理计算发现,SiSnF2在 大于2%的拉伸应变下转变为拓扑绝缘体.用遗传算法拟合了有效紧束缚模型的参数,计算了拓扑绝缘体SiSnF2 条带输运性质,发现边缘态也可能被随机空位缺陷破坏.对于长18.8 nm、宽8.2 nm的条带,在没有缺陷时, 电流集中在条带边缘,电导为拓扑边缘态的理想值2e²/h.当缺陷浓度为1%时,边缘电流已被明显扰动,但背 散射仍受到有效抑制,电流绕过缺陷向前传输.当浓度为5%时,边缘电子经散射深入条带内部,与另一边缘 发生散射,破坏了拓扑边缘态,使电导降为0.6e²/h.因此,缺陷导致的由拓扑绝缘体到普通绝缘体的转变是渐 变而不是突变.研究发现了明显的输运量子尺寸效应,增大条带宽度可减小边缘间电子散射,增强拓扑边缘 态的稳定性;而增大长度会增大电子的局域性和边缘间电子散射,降低拓扑边缘态的稳定性.

关键词: 拓扑绝缘体, 电子输运, 缺陷, 量子尺寸效应 PACS: 64.70.Tg, 61.46.Km, 73.43.Nq, 68.55.Ln CSTR: 32037.14.aps.74.20241503

DOI: 10.7498/aps.74.20241503

1 引 言

近些年来, 拓扑绝缘体 (topological insulators, TIs) 的相关研究一直受到广泛的关注^[1-8]. 拓扑绝 缘体在边界处或者表面具有受拓扑保护的边缘或 表面态. 目前已发现很多 TIs, 例如三维的 Sb₂Te₃^[9]、 二维的 HgTe/CdTe^[10] 和 InAs/GaSb^[11]. 二维 TIs 的边缘态与三维 TIs 的表面态相比, 对于缺陷导致 的背散射表现出更强的鲁棒性, 对于调控的响应也 更灵敏, 在量子相干输运和量子计算等应用上更有 优势^[12]. 硅烯、锗烯和锡烯等第 IV A 族元素构成 的二维 TIs 材料经化学修饰后, 它们的性能优良, 越来越接近实用, 因而具有广阔前景^[13,14]. 这些材 料具有较大的非平凡的拓扑带隙, 可以实现拓扑器 件在室温下的应用^[7,15]. 在近期的研究中,将 TIs 分为空间反演对称和空间反演不对称两类, 硅烯、 锗烯和锡烯等属于空间反演对称的 TIs^[13,14,16]. 对 于空间反演不对称的 TIs, 在具备非平凡的拓扑相 的同时,由于其偶极矩效应,还能为实现热释电、 拓扑 p-n 结和拓扑磁电效应提供理想的平台,第 IV A 族的二元化合物被认为是可能实现这种特性 的材料^[6,13,16,17].

单层的 SiSn 和 SiGe 等本身为拓扑平凡的小带隙半导体^[14,18],它们对应变的调控不敏感.比如 对具有高屈曲的 SiGe^[14] 直接施加双轴应变,将应 变增大至 6%,也只打开了 0.025 eV 的带隙.对单 层的 SiSn,即使施加大的应变调控,也只能使其转 变为金属相,而不是拓扑绝缘相^[19].近期有研究表 明,对这类二元材料进行化学修饰之后(比如氢化

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 11874315)、湖南省研究生科研创新项目 (批准号: CX20220663) 和湖南省教育厅科学研究项目 (批 准号: 23B0177) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: xiangyang_peng@xtu.edu.cn

^{© 2025} 中国物理学会 Chinese Physical Society

和卤化), 发现了一类新的不具有空间反演对称的 二维 TIs^[13]. 例如, GeSn 经过氢化和卤化后形成 GeSn X_2 (X = H, F, Cl, Br, I) 的单层结构, 其带隙 在 0.105—0.284 eV 之间^[13]. 在卤化形成的 GeSn X_2 体系中, 发现了能带反转, 预示着 GeSn X_2 是 TI^[13]. 对 GeSnH₂ 单层施加双轴应变, 当拉伸到 8% 时体 系发生拓扑相变成为 TI^[6,13]. 由于 GeSnH₂ 具有受 拓扑保护边缘态, 且具有较大的体带隙, 因此它们 有潜力成为室温拓扑绝缘体^[6].

拓扑绝缘体的独特优势和重要应用都基于其 拓扑边缘态优异的输运性质.由于受拓扑保护,一 般认为拓扑边缘态中的电子输运对外界干扰 (如掺 杂、缺陷)具有免疫性,且是无耗散的,因此基于 TI的电子器件具有高效、稳定和低功耗的特点^[12]. 但是在实际加工和应用中, 难免受缺陷和杂质等引 起的无序的干扰^[20]. 拓扑边缘态的优良性质都是 建立在材料本身是拓扑绝缘体的基础上的. 如果无 序破坏了材料本身的拓扑性质,边缘态就失去了拓 扑保护,所预期的优良性质就不存在了.虽然对拓 扑边缘态的磁学、光学和电子输运等性质已有很多 研究[21-26], 但是一般都基于理想情形. 基于密度泛 函理论 (density functional theory, DFT) 的计算 可以精确计算 TI 的各种性质, 但是受限于目前的 计算能力, DFT 计算一般只能研究原子数较少的 周期体系, 对具有 10 nm 以上尺度的介观无序系 统进行计算还有困难,相关计算研究还很少.随着 拓扑绝缘体研究的发展,现在更加具备了设计和制 备拓扑器件的条件,因此非常需要在更接近真实尺 寸和无序度的条件下,研究拓扑器件的输运性质. 例如,非磁性的缺陷是否能破坏拓扑边缘态,拓扑 边缘态在多大的无序度下仍能保持稳健,缺陷导致 的拓扑绝缘体向普通绝缘体的转变是突变还是渐 变,器件尺寸对具有不同浓度缺陷的拓扑材料输运 性质的影响.

针对上述问题,本文以 SiSnF₂ 单层为案例,结 合第一性原理方法和紧束缚 (tight binding, TB) 方法,对具有介观尺寸拓扑绝缘体的输运性质及其 无序和应变调控进行研究.采用 DFT 计算方法,在 验证了 SiSnF₂ 的动力学、机械和热学稳定 (300 K) 基础上,用遗传算法拟合得到了应变相关的紧束 缚 Slater-Koster (S-K) 参数^[27],构建了低能有效紧 束缚模型.本文通过局域电流密度的计算,清晰地 呈现了在介观尺寸的条带中,随着缺陷浓度增大, 边缘态从被拓扑保护状态到逐渐失去保护而被破 坏的过程.在没有缺陷时,输运电子是集中在条带 的边沿,沿直线向前传输.在缺陷浓度较小时,呈 现边缘态受拓扑保护情况,电流可以绕过缺陷向前 传输.继续增大缺陷浓度,拓扑边缘态被逐渐破坏. 当浓度达到 5%时,边缘态的拓扑保护已经失效, 边缘电子被缺陷散射后深度进入条带内部,与对面 边缘发生散射后,一部分电子朝后传输,电导显著 下降.这说明拓扑边缘态即使是非磁性缺陷也可能 破坏体系的拓扑边缘态.不大的缺陷浓度也能破坏 拓扑边缘态.同时我们还发现拓扑绝缘体的介观输 运有明显的量子尺度效应,改变条带的宽度和长度 可以显著改变拓扑边缘态的稳健性.这些研究结 果,将为拓扑绝缘体微电子学器件的设计和应用提 供有价值的参考.

2 研究方法

能带计算使用的是 VASP (Vienna ab initio simulation package)^[28,29]软件, 计算中使用广义梯 度近似下 Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA-PBE)^[30] 泛函描述体系的交换关联势. 平面波展开的截断 能为 600 eV. 优化计算的力场收敛精度为每原子 0.001 eV/Å. 在布里渊区, 以 Γ 点为中心, 使用 Monkhorst Pack^[31] 方法进行 9×9×1 的网格取样. 自旋-轨道耦合 (spin-orbital coupling, SOC) 已考虑在计 算中. 体系模型是周期性的薄层, 在 z 方向使用 20 Å 的真空层,用于解除该方向上的周期性效应.双轴 应变的调控描述为 $\varepsilon = \Delta a/a_0$,其中 a_0 为平衡晶 格, Δa + a₀ 为施加应变后的晶格. 紧束缚模型的 S-K参数拟合和能带的计算使用本课题组开发的 遗传算法结合了紧束缚软件包 Pybinding^[32]. 在我 们的算法中, 定义一个目标参数 $\sigma(k)$ 用于估计 TB 能带数据与 DFT 能带数据的差异:

$$\sigma\left(k\right) = \sum_{k,n} \alpha_n\left(k\right) \left[E_n^{\text{TB}}\left(k\right) - E_n^{\text{DFT}}\left(k\right)\right]^2, \quad (1)$$

其中 $k = (k_x, k_y, k_z)$ 是体系倒空间中的波矢量;下标 n是表示第 n条能带; $E_n^{\text{TB}}(k)$ 和 $E_n^{\text{DFT}}(k)$ 分别表示第 n条能带在倒空间某个 k 点处的能量; $\alpha_n(k)$ 是权重因子,一般拟合模型下,设定 $\alpha_n(k) = 1$.对于特殊的对称点,比如 Γ , M和 K等,以及某些带,可以通过适当调整权重因子的值来调节拟合中所占的比重.将所有拟合点的方差累加,得到拟合

目标 $\sigma(k)$.我们使用遗传算法进行参数选择,初 始阶段随机生成 100 组 S-K 紧束缚参数,计算这 100 组参数的 TB 能带数据与 DFT 能带数据的 $\sigma(k)$, $\sigma(k)$ 值比较大的说明误差大,适应程度差, 进行淘汰. $\sigma(k)$ 值比较小的 S-K 参数保留,并对 这些优秀组的 S-K 参数进行交叉置换,补上淘汰 的参数组.通过反复进行 N代这样的优选,尽量实 现对参数空间的近似遍历,得到符合需要的 S-K 参数优化解.

输运的相关计算基于低能有效的紧束缚模型, 通过 Kwant 的散射波函数方法^[33] 计算输运相关 的性质. 局域电流的计算方法为^[33]

$$J_{ab} = i \left[\boldsymbol{\psi}_{b}^{\dagger} (\boldsymbol{H}_{ab})^{\dagger} \boldsymbol{M} \boldsymbol{\psi}_{a} - \boldsymbol{\psi}_{a}^{\dagger} \boldsymbol{M} \boldsymbol{H}_{ab} \boldsymbol{\psi}_{b} \right], \qquad (2)$$

其中 H_{ab} 是从格点 b 到格点 a 的跳跃矩阵, $\psi_a(\psi_b)$ 是 a(b) 格点上的波函数分量组成的矢量, $\psi_a^{\dagger}(\psi_b^{\dagger})$ 是 $\psi_a(\psi_b)$ 的厄米共轭, M 是密度矩阵. 基于 Landauer-Büttiker 公式计算体系的平均电导^[34-36]:

$$\langle G \rangle = \left\langle 2 \sum_{i}^{n} \tau_{i} \right\rangle, \tag{3}$$

透射本征值_{7i}可以通过透射矩阵求解得到.这里, G是电导,本文中单位设定为 e²/h, e 表示电子电荷, h 是普朗克常数. 尖括号表示对系综的统计平均^[37]. 本文研究的随机空位缺陷,参考的是文献 [20] 所使 用的方法. 通过随机生成格点坐标, Kwant 软件可 以根据生成的坐标数据, 自动构建缺陷.

3 结果与讨论

二维的 SiSn 单层具有六边形的几何结构, 垂 直于平面的方向上带有屈曲, 屈曲高度、Si—Sn 键 长和键角 (θ) 分别为 0.67 Å, 2.52 Å和 113.3°^[18]. 对于具有较大的屈曲幅度的结构, 通过官能化、表 面吸附和外加电场^[6,7,13,38] 等, 可以更容易对其带 隙进行调控, 并且具有更宽的调控范围. 使用 F 原 子进行官能化之后, 得到的 SiSnF₂ 单层的晶格常数 a = b = 4.49 Å, 屈曲高度、Si—Sn 键长和键角 θ 分 别为 0.66 Å, 2.68 Å和 104.2° (Si—F 键长为 1.64 Å, Sn—F 键长为 1.95 Å), 结构如图 1 所示. 定义屈 曲角为 $\varphi = \theta - 90^\circ$. 对无应变和施加 5% 应变的 SiSnF₂ 单层的稳定性进行计算, 结构表明, 应变前 后的结构具有动力学、热学和机械稳定性, 相关细 节见补充材料 (online).



图 1 (a) SiSnF₂ 单层的俯视图 (上) 和正视图 (下), 灰色、 黄色和红色的原子分别是 Si, Sn 和 F 原子; (b) Si—Sn 键 与法线的夹角 θ (上) 和六边形布里渊区 (下), Γ , K和 M是 高对称点

Fig. 1. (a) Top view (top) and side view (bottom) of the monolayer SiSnF₂. The gray, yellow, and red spheres represent the Si, Sn, and F atoms, respectively. (b) The angle between the Si—Sn bond and the normal θ (top) and the hexagonal Brillouin zone (bottom) where Γ , K, and M are high symmetry points.

SiSn 在 K 点有小的带隙, 是普通绝缘体. 施加 应变后, SiSn 并不能转变为拓扑绝缘体, 而是由普通 绝缘相转变为金属相^[19]. 计算发现, SiSn 经氟化成 为 SiSnF₂后,其能带的带隙从 K 点移到了 Γ 点 (见 图 2). 不考虑自旋-轨道耦合 (spin-orbital coupling, SOC) 作用时, 带隙为 0.29 eV. 考虑 SOC 相互作 用后,带隙变为 0.20 eV,同时能带发生了自旋劈 裂.对 SiSnF,施加双轴拉伸应变,可以对带隙进行 有效调控,如图 2(c) 所示. 在不考虑 SOC 时,带隙 首先随着拉伸的增大而减小,当应变 ϵ 约为3%时, 带隙开始闭合,而继续增大拉伸应变,带隙维持闭 合,因而在带隙处没有发生能带反转.考虑 SOC 后,带隙在约2%的拉伸时变为零.随着拉伸的增 大,带隙在闭合之后又重新打开,预示着体系可能 发生了能带反转,变成了拓扑绝缘体[6,13,19].为了进 一步探究带隙闭合前后体系拓扑性质的转变,对 Γ点带隙附近价带顶和导带底处总共的6条能带 的轨道成分进行了分析,发现这些能带主要是来 自Si和Sn的s和p轨道的贡献,F元素的轨道贡 献很小. 在没有施加应变 ($\varepsilon = 0\%$) 时 (带隙闭合 前)和施加 $\varepsilon = 5\%$ 拉伸应变后(带隙重新打开后), 价带顶和导带底在 Γ 点的轨道成分变化如图 2(d), (e) 所示, 按从导带底到价带顶的顺序, 即从1到 6 的顺序, 当 $\varepsilon = 0\%$ 时, 能带的主要轨道成分为 ppppss; 而当 $\varepsilon = 5\%$ 时, 主要轨道成分的顺序转 变为 sspppp, 能带发生了反转, 说明拉伸应变使





Fig. 2. (a), (b) Band structures without and with SOC, respectively; (c) the band gap variation with respect to tensile strains; (d), (e) the orbital composition diagrams of the 6 bands, as indicated in panel (b), near the Fermi level at the Γ point under the tensile strains of $\varepsilon = 0\%$ and 5%, respectively; (f) the buckling angles under different strains.

表 1 用遗传算法拟合 DFT 能带得到的 SiSnF₂ S-K 参数, 单位是 eV Table 1. The S-K parameters obtained by genetic fitting of the DFT bands of SiSnF₂. All parameters are in units of eV. sso spo ppo $pp\pi$ ε_s^{Si} ε_p^{Si} ε_s^{Sn} ε_p^{Sn}

-6.84

-0.69

SiSnF₂从普通绝缘体变成了拓扑绝缘体. 屈曲角随着拉伸应变的增大而减小, 在 $\varepsilon < 10\%$ 范围内, 屈曲角与拉伸应变成线性关系, 如图 2(f) 所示.

2.341

2.18

-1.461

从图 2(d), (e) 可见, SiSnF₂ 在价带顶和导带 底的能带, 主要是由 Si 和 Sn 原子的 s, p_x 和 p_y 轨 道组成. 因此我们以 Si 原子和 Sn 原子的 s, p_x 和 p_y 轨道为基矢, 构造 SiSnF₂ 的低能有效紧束缚哈 密顿量:

$$H_0 = \varepsilon_{i\alpha} \sum_{i\alpha} c^{\dagger}_{i\alpha} c_{i\alpha} - t_{i\alpha,j\beta} \sum_{\langle i,j\rangle\alpha,\beta} c^{\dagger}_{i\alpha} c_{j\beta}, \qquad (4)$$

其中, $c_{i\alpha}^{\dagger}$ 和 $c_{i\alpha}$ 是电子的产生和湮灭算符. 下标中的 α , $\beta \in (s, p_x, p_y)$ 是原子轨道指标, i为对应格 点的指标, $\langle i, j \rangle$ 表示最近邻的第 i个格点和第 j个格点, 方程右边第 1 项中的 $\varepsilon_{i\alpha}$ 为第 i个格点的 α 轨道的格点能, 第 2 项中的 $t_{i\alpha,j\beta}$ 是第 i个格点

的 α 轨道与其最近邻的第 *j* 个格点的 β 轨道之间 的跳跃能. (4) 式中的哈密顿量用到 Si 和 Sn 原子 的多个轨道, 涉及了 4 个格点能和 4 个跳跃能参数. 我们用遗传算法, 通过拟合 DFT 能带数据, 得到 了这 8 个 S-K 参数^[27], 如表 1 所列.

-2.686

0.741

5.07

表 1 中的 S-K 参数 (ε_s^{Si} , ε_p^{Si} , ε_s^{Sn} , ε_p^{Sn}) 是 Si 原子和 Sn 原子格点能, 而 (sso, spo, ppo, pp π) 4 个 S-K 参数则是与跳跃能有关. 图 3(a) 是用表 1 中 的参数计算的在零应变下 SiSnF₂ 的紧束缚能带, 可 见与 DFT 能带在输运相关的低能区 (-1 eV, 1 eV) 符合得很好.

进一步考虑 SOC 时, 需要在 (4) 式的基础上 加上与 SOC 相关的哈密顿矩阵^[6]:

$$\boldsymbol{H}_{\text{SOC}} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{H}_{\text{SOC}}^{\uparrow\uparrow} & \boldsymbol{H}_{\text{SOC}}^{\uparrow\downarrow} \\ \boldsymbol{H}_{\text{SOC}}^{\downarrow\uparrow} & \boldsymbol{H}_{\text{SOC}}^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (5)$$



图 3 用表 1 中 S-K 参数计算 SiSnF₂ 的紧束缚能带 (红色实线) 和第一性原理计算的能带 (黑色虚线) (a), (b), (c) 和 (e), (f), (g) 分 别是不考虑和考虑 SOC 的情形下, 分别施加 0%, 2% 和 5% 应变的能带; (d), (h) 是不考虑和考虑 SOC 时的 TB 带隙和 DFT 带隙 随应变的变化

Fig. 3. (a), (b), (c) and (e), (f), (g) Energy bands calculated by the tight-binding model (red solid lines) using the S-K parameters in Table 1 and by first-principles calculations (black dashed lines) without and with SOC under 0%, 2%, and 5% strain, respectively; (d), (h) the variations of the TB and DFT band gaps with respect to the strains without and with SOC, respectively.

我们使用的是 Si 原子和 Sn 原子的 s, p_x , p_y 轨道, 得到关于自旋向上-自旋向上的 6×6 哈密顿矩阵:

自旋向下-自旋向下的矩阵 $H_{SOC}^{\downarrow\downarrow} = -H_{SOC}^{\uparrow\uparrow}$,不同 方向自旋之间的矩阵 $H_{SOC}^{\uparrow\downarrow} = H_{SOC}^{\uparrow\uparrow} = 0$.我们用 DFT 计算了包含 SOC 的能带,通过拟合 DFT-SOC 能带,得到的 Si 原子和 Sn 原子的 SOC 参数为: $\lambda_{Si} =$ 0.05 eV, $\lambda_{Sn} = 0.23$ eV,后者明显比前者大,说明 Sn 原子的自旋-轨道耦合比 Si 原子的要强很多.用 表 1 中的 S-K 参数和拟合的 SOC 参数,计算了考 虑了 SOC 的紧束缚能带,与相应的 DFT 能带比 较在低能区符合得很好,如图 3(e) 所示.

由前面讨论, SiSnF2 在拉伸超过 2% 后变为拓

扑绝缘体.为了用紧束缚方法研究在拉伸应变下成 为 TI 的 SiSnF₂ 的输运, 需要知道紧束缚参数随应 变的变化. 由图 2(f) 可知, 屈曲角 φ 在双轴应变 $\varepsilon <$ 10% 时与应变基本成线性关系,因此可用线性公 式 $\varphi = \varphi_0 + \eta \varepsilon$ 描述屈曲角随应变的变化, 其中 φ_0 是应变 $\varepsilon = 0\%$ 时的屈曲角^[39]. 根据图 2(f) 中 的结果进行线性拟合,可以得到 $\eta = -39.$ 方程(4) 中的跳跃能t_{iα.jβ}是屈曲角的函数^[39]. 屈曲角是 应变的线性函数,从而应变会改变跳跃能.根据 应变的 TB 模型^[6], 可以得到在不同应变下方程 (4) 中哈密顿量的参数,由此计算出在不同应变下的 TB 能带, 如图 3(b), (c) 与图 3(f), (g) 所示. 我们 进一步比较了 TB 能带和 DFT 能带的带隙随应变 的变化, 图 3(d), (h) 的结果表明 TB 带隙和 DFT 带隙符合得比较好.可见在不同应变下,考虑或不 考虑 SOC, TB 能带与 DFT 能带在低能区符合得 很好.

所研究器件的结构如图 4(a) 所示,主要是由 3 个部分构成,中心散射区和左右两个半无限的



图 4 (a) 用来计算 SiSnF₂ 输运的构型, 其中, 中间散射区是 SiSnF₂ 锯齿条带, 两端连接由 SiSnF₂ 锯齿条带构成的左右电极, 所示 红色矩形是条带内部的结构单元; (b), (d), (f) 分别是随机缺陷浓度为 0%, 1%, 3% 时散射区 SiSnF₂ 条带的结构图; (c), (e), (g) 分 别对应图 (b), (d), (f) 在激发能取 E = 0.002 eV 时的局域电流分布, 箭头表示局部电流方向, 图中的红色圆圈指示缺陷的位置 Fig. 4. (a) Configuration employed to calculate the transport in SiSnF₂: the central scattering region is a SiSnF₂ zigzag ribbon,

Fig. 4. (a) Comparation employed to calculate the transport in ShSh_2 , the central scattering region is a ShSh_2 zigzag ribbon, whose two ends are connected to the left and right electrodes made of SiSnF_2 zigzag ribbon. The red rectangle indicates the structure unit inside the ribbon. (b), (d), (f) Scattering region with random defects of the concentrations of 0%, 1% and 3%, respectively; (c), (e), (g) the local current distributions corresponding to panel (b), (d), (f), respectively, when excitation energy E = 0.002 eV. The arrows indicate the direction of local current. The red circles in this figure designate the location of the defects.

导线,导线沿着箭头方向延展.在得到 S-K 紧束缚 模型的参数之后,由于我们计算输运的体系是矩形 的纳米条带,原来的原胞基矢是非正交的,所以需 要将基矢转变为正交的,构建矩形原胞(见图 4(a) 中的红框).原胞内格点之间的相互作用,以及原胞 格点与近邻原胞中的格点的相互作用,根据 S-K 方法^[27]进行计算,得到哈密顿矩阵.通过平移对 称,构造矩形条带.为了方便,条带的长度和宽度 使用矩形原胞(cell)作为单位,已在图 4(a)中标出.

条带边缘处原子的配位数小于内部原子的配 位数,其面内的 p_x 和 p_y 轨道没有被饱和因而存在 悬挂键.为了消除边缘处的悬挂键的影响,使用 H 原子将边缘的 Si 原子和 Sn 原子进行饱和钝化,因 此需要在 (1) 式的 TB 模型中增加与 H 原子有关 的紧束缚参数,用于描述 H 原子的格点能和 Si—H 键与 Sn—H 键对应的跳跃能.由于图 4(a)中纳米 条带的上下两侧分别是 Si 和 Sn 原子,需要用不同 的 TB 参数来描述 Si-H 和 Sn-H 相互作用.根据文 献 [40] 的方法,得到了饱和 H 原子的 S-K 参数,如 表 2 所列,其中 A 和 B 分别标记用来钝化 Si 和 Sn 原子的 H 原子.

表 2 从 DFT 计算的数据拟合得到的 S-K 参数, 所有参数的单位是 eV

Table 2. The S-K parameters obtained from fitting the data of DFT calculations. The units for all parameters are eV.

$\mathrm{ss}\sigma^A$	${\rm sp}\sigma^A$	$\mathrm{ss}\sigma^{\mathrm{B}}$	${\rm sp}\sigma^{\rm B}$	$\varepsilon^{\rm A}_{\rm s}$	$\varepsilon^{\mathrm{B}}_{\mathrm{s}}$
-4.87	5.15	-4.21	5.43	-1.84	-2.40

根据前面讨论, 当双轴拉伸应变大于 2% 时, SiSnF₂发生拓扑相变, 从普通绝缘体变成拓扑绝 缘体.为研究不同浓度缺陷对拓扑绝缘体的影响, 研究了 SiSnF₂在 5% 的拉伸应变下的电子输运. 在计算中费米能级都设置为 0, 激发能大小都是相 对于费米能级.下面讨论激发能为 0.002 eV 的情 况, 此时参与导电的电子能量接近费米能级. 电子 的传输方向设定为从左向右. 我们也研究了激发能 为 0.01 eV 和 0.1 eV 的情形, 所得结论与激发能 取 0.002 eV 的类似.

我们计算了长度 L = 40、宽度 W = 10 的 SiSnF₂ 条带输运性质,其尺寸在 5% 的拉伸下为长 18.8 nm、 宽 8.2 nm,共 1600 个 Si 和 Sn 原子,达到了实际 应用的尺寸.对于没有缺陷的完美条带 (图 4(b)), 计算了电流在条带上的分布如图 4(c) 所示,发现 参与传导的电子集中在条带的上下边缘,而在条带 内部几乎没有电子参与导电.这说明该体系内部处 于绝缘态,而边缘处于导通态.此时电导的计算值 为 2 (以 e^2/h 为单位,下同),与拓扑绝缘体的边缘 态的电导的理论值相符.

理论预言拓扑绝缘体的边缘态由于受拓扑保 护,缺陷不会造成电流的背散射,因而对边缘态的 电导影响很小.但是这些是对理想拓扑绝缘体的定 性研究,对非理想的拓扑绝缘体还缺乏定性和定量 研究. 例如, 当缺陷浓度增大到一定程度后, 边缘态是否仍受拓扑保护或者是被破坏; 如果拓扑边缘态被缺陷破坏, 这个过程是突变还是渐变的. 为此在 SiSnF₂条带中随机引入空位缺陷, 研究缺陷浓度对拓扑边缘态的影响.

我们计算了缺陷浓度为0%,1%和3%时的电 子输运,结构分别如图 4(b), (d), (f) 所示. 当缺陷浓 度为1%时,可以看到条带内部仍然没有电流通过, 电流仍然集中在靠近条带边缘的通道上,如图 4(e) 所示. 此时缺陷浓度比较低, 条带内的拓扑绝缘态 还没有被破坏,边缘态仍然受拓扑保护,电流绕过 边缘处的缺陷继续向前传播,没有被散射到条带内 部,此时条带两个边缘的电子输运互不干扰.计算 的平均电导为 1.9 (见图 5(a)), 仍然接近理想值 2, 说明浓度为1%的缺陷对拓扑边缘态影响较小.当 缺陷浓度逐渐增大为2%,3%和4%时,电导逐渐 减小为 1.5, 1.1, 0.8 (见图 5(a)), 电导显著减小, 体 系从拓扑绝缘体向普通绝缘体逐步过渡,而不是发 生突变. 图 4(g) 所示为缺陷浓度增大到 3% 时的 情况,此时电流不再集中在条带边缘,两个边缘处 的电子经缺陷散射后,进入条带内部产生混合,等 效于在两个边界之间发生了散射[4]. 此时电子不 总是绕过缺陷向前运动,有部分电子经缺陷散射后 向后运动,在条带内部出现了混乱的电子流动,破坏



图 5 (a) 固定长度 L = 40,不同宽度的 SiSnF₂条带的平均电导随缺陷浓度的变化, 插图为长度 L = 40, W = 10 的条带在缺陷 浓 0% 度和 5% 情形下,电导平台的变化; (b) 固定条带宽度 W = 40,不同长度的 SiSnF₂条带条带的平均电导随缺陷浓度的变化, 插图为长度 L = 120, W = 40 的条带在缺陷浓度 0% 和 5% 情形下,电导平台的变化; 激发能 E 取值为 0.002 eV

Fig. 5. (a) Average conductance versus the defect concentration for SiSnF_2 ribbons of different widths with fixed length L = 40. The inset: the conductance plateau for the strip change with length L = 40 and width W = 10 at defect concentrations of 0% and 5%. (b) The average conductance versus the defect concentration for SiSnF_2 ribbons of different lengths with fixed width W = 40. The inset: the conductance plateau for the strip change with length L = 120 and width W = 40 at defect concentrations of 0% and 5%. The excitation energy is set to be 0.002 eV.

了拓扑边缘态. 当缺陷浓度为 5% 时, 电导减小到 0.6 (见图 5(a)), 根据随机矩阵理论和输运的研究 结论, 体系的平均电导小于 1 时, 对应普通绝缘体 的情形^[15,37]. 结合图 5(a) 的插图也可以看到, 此时 红色线的电导平台已经被破坏, 体态对应的电子受 到剧烈散射.

一般认为只有磁性缺陷才对拓扑绝缘体的边 缘态有明显影响,而非磁性缺陷对拓扑边缘态的影 响很小.以上研究表明,虽然拓扑绝缘体的边缘态 受拓扑保护,但即使对非磁性缺陷,在缺陷到达一 定浓度时,这种保护也会失效.在缺陷浓度不太大 的情况下,拓扑边缘态可能就会被破坏.这提示在 未来的拓扑材料应用中,控制缺陷浓度依然是很重 要的.

现在进一步研究非理想拓扑材料的电子输运 与尺寸的关系. 计算了不同尺寸的 SiSnF, 条带在 5% 拉伸下的电导. 对每一个固定的缺陷浓度, 计 算了 1000 个随机缺陷结构的电导 G, 并对其取平 均,得到平均电导(G).先研究电导与条带宽度 W 的关系.为此,先固定长度 L = 40,宽度 W依次取 10, 20, 30, 其对应的实际尺寸为:长 18.8 nm, 宽分 别为 8.2, 16.4 和 24.6 nm, 分别包含了 1600, 3200 和 4800 个 Si 和 Sn 原子. 图 5(a) 所示为平均电导 在不同缺陷浓度下随宽度 W的变化. 在没有缺陷 时, 电导都为 2, 与理想拓扑绝缘体的电导值一致. 对于这3种宽度,体系的平均电导都随着缺陷浓度 增大而下降,但它们对缺陷的稳健性明显不一样. 同样的缺陷浓度下, 越宽的条带的平均电导越大, 受缺陷的干扰越小. 例如在缺陷浓度为 4% 时, 宽 度为 W = 10 的条带的平均电导已小于 1, 这表明 此时体系的拓扑边缘态已经遭到严重破坏,体系由 于缺陷的影响转变为普通的绝缘体[15,37]. 将宽度增 大一倍和两倍至 W = 20 和 30, 与 W = 10 比较, 电导随缺陷浓度的下降明显平缓了很多. 在缺陷浓 度为 4% 时, 与 W = 10 的电导比较, W = 20 的平 均电导明显更大, 而 W = 30 的平均电导大小则超 过了一倍.由此可见,条带宽度对体系拓扑边缘态 的鲁棒性有重要影响,更宽的条带对无序具有更好 的稳健性. 从图 4 可以看到, 沿边缘传输的一部分 电子会因缺陷散射进入条带内部. 如果条带的宽度 足够大,在它们到达右边的接收端前,不能达到另 一边缘,则电子可以绕过缺陷继续向前传输,此时 拓扑边缘态电子输运基本不受影响,如图 4(e) 所

示;如果宽度不够大,则电子由一个边缘经散射后 可以达到另一边缘,发生两个边缘间的散射,使它 们向左传输,此时电导显著减小,拓扑边缘态向普 通绝缘态转变,如图 4(f)所示.所以在拓扑器件的 设计中,除了减少缺陷浓度外,还可以通过增大条 带的宽度来增大器件拓扑性质的稳定性.

本文还探究了长度对有缺陷 TI 的输运性质的 影响. 固定条带宽度 W = 20, 长度 L 分别取 40, 80 和 120, 其对应的实际尺寸为: 宽 16.4 nm, 长分别 为18.8, 37.6 和 75.2 nm, 分别包含了 3200, 6400 和 9600 个 Si 和 Sn 原子, 它们的平均电导计算结 果如图 5(b) 所示. 随着缺陷浓度的增大, 它们的平 均电导都随之下降,越长的条带,平均电导下降得 越快. 插图的结果同样表明, 电导平台已经被破坏, 体态对应的电导出现了剧烈衰减,这预示了体带隙 遭到破坏. 在缺陷浓度为 4% 时, L = 40 的条带的 电导约为 L = 120 的两倍. 边缘的一部分电子经散 射进入条带内部,条带越长,它们越可能到达对面 边缘,越容易发生边缘间散射,减少电子到达右端 的可能性,使电导减小.这里还可以通过体系的各 部分竞争来解释, 定义局域化参数 $s = L/nL_0$, s 越 大越局域^[15,37], L为条带长度, n为传导通道, 当 $W和 E 固定时, n 也是常数, L_0 是传导电子的平均$ 自由程.对于同一个缺陷浓度,电子的平均自由程 不变,随着 L 的增大, s 的值也增大,也就是体系变 得越局域,导电性越差.所以对有缺陷的拓扑绝缘 体条带,长度越长,平均电导随缺陷浓度增加下降 得越快.因此在拓扑器件的应用中,可以通过减少 条带的长度来减少缺陷对拓扑性质的影响.

4 结 论

一般认为拓扑绝缘体的边缘态有很好的拓扑 保护,因而拓扑边缘态对非磁性缺陷的扰动具有很 强的鲁棒性,但是这个观点还需要在器件应用的介 观尺度上进行验证.我们用第一性原理方法研究了 应变对单层 SiSnF₂ 拓扑相的调控,用紧束缚方法 研究了 SiSnF₂ 通过应变成为拓扑绝缘体后,在不 同缺陷浓度和尺寸下的输运性质.我们构建了包含 有数千原子的单层 SiSnF₂ 条带,计算发现拓扑对 边缘态有保护作用,但是在一定缺陷浓度下,边缘 态可以被破坏.对于 L = 40 和 W = 10 的条带,当 没有缺陷时,条带的电导为 $2e^2/h$,与理想拓扑边 缘态的电导相符,条带内部没有电流,电流都集中在 两个边缘. 当缺陷密度增至1%时, 拓扑边缘态仍 然有效, 电流虽然受到散射, 但仍能借道条带内部 绕过缺陷向前传播,此时电导略有下降.当缺陷浓 度增大到5%时,两个边缘的电子都深度进入条带 内部并接近对面边缘,发生边缘间散射,此时部分 电子发生背散射而向后流动,电导值小于 0.6e²/h, 转变为普通绝缘体. 所以不太大的非磁性缺陷的浓 度就可以显著破坏拓扑边缘态,这提示在拓扑器件 中控制缺陷浓度很重要.同时研究拓扑绝缘体条带 输运的量子尺寸效应.发现条带的宽度越大,拓扑 边缘态就越稳定,同样缺陷密度下的平均电导也越 大. 这是由于增大宽度减小了边缘间电子散射的可 能性. 同时还发现, 增大条带的长度, 会增大电子 的局域度和边缘间电子散射的可能性,使得拓扑边 缘态更容易受到破坏. 所以在制备拓扑器件时, 可 以通过增大条带宽度和减小长度来提高拓扑边缘 态的稳定性.

参考文献

- [1] Kane C L, Mele E J 2005 Phys. Rev. Lett. 95 226801
- [2] Kane C L, Mele E J 2005 Phys. Rev. Lett. 95 146802
- [3] Moore J E 2010 Nature 464 194
- [4] Hasan M Z, Kane C L 2010 Rev. Mod. Phys. 82 3045
- [5] Qi X L, Zhang S C 2011 Rev. Mod. Phys. 83 1057
- [6] Aslani Z, Sisakht E T, Fazileh F, Ghorbanfekr-Kalashami H, Peeters F M 2019 Phys. Rev. B 99 115421
- [7] Ezawa M 2015 J. Phys. Soc. Jpn. 84 121003
- [8] Cheng S G, Liu H, Jiang H, Sun Q F, Xie X C 2018 Phys. Rev. Lett. 121 156801
- [9] Zhang H, Liu C X, Qi X L, Dai X, Fang Z, Zhang S C 2009 *Nat. Phys.* 5 438
- [10] Konig M, Wiedmann S, Brune C, Roth A, Buhmann H, Molenkamp L W, Qi X L, Zhang S C 2007 Science 318 766
- [11] Knez I, Du R R, Sullivan G 2011 Phys. Rev. Lett. 107 136603
- [12] Chuang F C, Yao L Z, Huang Z Q, Liu Y T, Hsu C H, Das

T, Lin H, Bansil A 2014 Nano Lett. 14 2505

- [13] Ma Y, Kou L, Du A, Heine T 2015 Nano Res. 8 3412
- [14] Teshome T, Datta A 2018 ACS Omega 3 1
- [15] Liu W, Luo C, Peng X 2024 J. Phys. Condens. Mat. 36 165401
- [16] Zhang S J, Ji W X, Zhang C W, Li S S, Li P, Ren M J, Wang P J 2016 RSC Adv. 6 79452
- [17] Li S S, Ji W X, Zhang C W, Li P, Wang P J 2016 J. Mater. Chem. C 4 2243
- [18] Şahin H, Cahangirov S, Topsakal M, Bekaroglu E, Akturk E, Senger R T, Ciraci S 2009 *Phys. Rev. B* 80 155453
- [19] Wang Y, Ding Y 2016 Appl. Surf. Sci. 382 1
- [20]~ Li T C, Lu S P 2008 Phys. Rev. B 77 085408
- [21] Li Y Q, Liu Y Y, Zhang Q, Zhao C Z, Sun J L, Li Y H, Liu Y, Ning P F, Liu Y, Xing H Y 2025 *Physica B* 698 416757
- [22] Pineda-Medina R, Vinck-Posada H, Herrera W J 2025 Solid State Commun. 395 115729
- [23] Lü X L, Xie H 2022 New J. Phys. 24 033010
- [24] Li S, Liu T, Liu C, Wang Y, Lu H Z, Xie X 2024 Nat. Sci. Rev. 11 296
- [25] Huang L, He L, Zhang W X, Zhang H Z, Liu D N, Feng X, Liu F, Cui K Y, Huang Y D, Zhang W, Zhang X D 2024 Nat. Commun. 15 1647
- [26] Liu C, Wang Y Y 2023 Acta Phys. Sin. 72 177301 (in Chinese) [刘畅, 王亚愚 2023 物理学报 72 177301]
- [27] Slater J C, Koster G F 1954 Phys. Rev. 94 1498
- [28] Kresse G, Furthmüller J 1996 Comp. Mater. Sci. 6 15
- [29]~ Kresse G, Furthmüller J 1996 Phys. Rev. B $\mathbf{54}$ 11169
- [30] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 Phys. Rev. Lett. 77 3865
- [31] Monkhorst H J, Pack J D 1976 Phys. Rev. B 13 5188
- [32] Moldovan D 2016 Pybinding v0.8.0: A Python Package for Tight-binding Calculations (Zenodo)
- [33] Groth C W, Wimmer M, Akhmerov A R, Waintal X 2014 New J. Phys. 16 063065
- [34] Imry Y, Landauer R 1999 Rev. Mod. Phys. 71 S306
- [35] Landauer R 1957 *IBM J. Res. Develop.* **1** 223
- [36] Büttiker M 1986 Phys. Rev. Lett. 57 1761
- [37] Hsu H C, Kleftogiannis I, Guo G Y, Gopar V A 2018 J. Phys. Soc. Jpn. 87 034701
- [38] Ezawa M 2012 New J. Phys. 14 033003
- [39] Rezaei M, Sisakht E T, Fazileh F, Aslani Z, Peeters F M 2017 Phys. Rev. B 96 085441
- [40] Deylgat E, Tiwari S, Vandenberghe W G, Sorée B 2022 J. Appl. Phys. 131 235101
- [41] Vannucci L, Olsen T, Thygesen K S 2020 Phys. Rev. B 101 155404

Influence of non-magnetic defects and quantum size effects in two-dimensional $SiSnF_2^*$

LIU Wenchao LUO Chaobo XIE Zitong PENG Xiangyang[†]

(Hunan Provincial Key Laboratory of Micro-Nano Energy Materials and Devices, School of Physics and Optoelectronic, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China)

(Received 27 October 2024; revised manuscript received 9 January 2025)

Abstract

It is generally believed that topological insulators are highly immune to non-magnetic defects, but there is still a lack of verification on a mesoscopic scale of device applications. We take $SiSnF_2$ monolayer ribbons as an illustration to study the effects of defects and sizes on the electron transport in topological insulators. Firstprinciples calculations show that $SiSnF_2$ is transformed into a topological insulator under a tensile strain greater than 2%. The data of an effective tight-binding model are obtained by using a genetic algorithm to calculate the transport properties of the topological insulator $SiSnF_2$ ribbons, and it is found that edge states can also be disrupted by random vacancy defects. For a ribbon with a length of 18.8 nm and a width of 8.2 nm, when it has no defects, the current is concentrated at its edge, and its conductance is an ideal value of the topological edge state, $2e^2/h$. When the defect concentration is 1%, the edge current is appreciably disturbed, but the backscattering is still effectively suppressed, and the current bypasses the defect and still goes forward. When the concentration is 5%, the edge electrons are scattered deep into the ribbon and scattered with the opposite edge, destroying the topological edge state and reducing the conductance to $0.6e^2/h$. Therefore, the transformation from topological to normal insulator caused by defects happens gradually rather than suddenly. Found in this study is an obvious transport quantum size effect, i.e. increasing the ribbon width can reduce electron scattering between edges and enhance the stability of topological edge states; while increasing the length will increase electron localization and electron scattering between edges, reducing the stability of topological edge states.

Keywords: topological insulators, electron transport, defects, quantum size effects

PACS: 64.70.Tg, 61.46.Km, 73.43.Nq, 68.55.Ln

DOI: 10.7498/aps.74.20241503

CSTR: 32037.14.aps.74.20241503

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11874315), the Graduate Research and Innovation Program of Hunan Province, China (Grant No. CX20220663), and the Scientific Research Fund of Hunan Provincial Education Department, China (Grant No. 23B0177).

 $[\]dagger$ Corresponding author. E-mail: <code>xiangyang_peng@xtu.edu.cn</code>





Institute of Physics, CAS

二维SiSnF。中非磁性缺陷的影响和量子尺寸效应

刘文超 罗朝波 谢紫彤 彭向阳

Influence of non-magnetic defects and quantum size effects in two-dimensional SiSnF2

LIU Wenchao LUO Chaobo XIE Zitong PENG Xiangyang

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 74, 066401 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20241503 CSTR: 32037.14.aps.74.20241503 在线阅读 View online: https://doi.org/10.7498/aps.74.20241503 当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

磁性拓扑绝缘体中的量子输运现象

Quantum transport phenomena in magnetic topological insulators 物理学报. 2023, 72(17): 177301 https://doi.org/10.7498/aps.72.20230690

拓扑绝缘体中量子霍尔效应的研究进展

Research progress of quantum Hall effect in topological insulator 物理学报. 2023, 72(17): 177302 https://doi.org/10.7498/aps.72.20230698

一维超导微波腔晶格中反旋波效应对拓扑相变和拓扑量子态的调制

Modulation of topological phase transitions and topological quantum states by counter-rotating wave effect in one-dimensional superconducting microwave cavity lattice

物理学报. 2023, 72(24): 244204 https://doi.org/10.7498/aps.72.20231321

一维超导传输线腔晶格中的拓扑相变和拓扑量子态的调制

Modulation of topological phase transitions and topological quantum states in one-dimensional superconducting transmission line cavities lattice

物理学报. 2022, 71(19): 194203 https://doi.org/10.7498/aps.71.20220675

一维耦合腔晶格中磁子-光子拓扑相变和拓扑量子态的调制

Modulation of topological phase transition and topological quantum state of magnon-photon in one-dimensional coupled cavity lattices

物理学报. 2024, 73(4): 044203 https://doi.org/10.7498/aps.73.20231519

Li(Na)AuS体系拓扑绝缘体材料的能带结构

Band structure of topological insulator Li(Na)AuS

物理学报. 2021, 70(2): 027101 https://doi.org/10.7498/aps.70.20200885